

УДК 539.386

*А.И. Дмитриев, А.Ю. Никонов, С.Г. Псахье***Молекулярно-динамическое исследование особенностей контактного взаимодействия на атомном масштабе***A.I. Dmitriev, A.Yu. Nikonov, S.G. Psakhie***Molecular Dynamics Investigation of Features of Contact Interaction on the Atomic Scale**

Работа посвящена моделированию взаимодействия двух чистых металлов в условиях сдвигового нагружения. Показано, что структура граничного слоя, получаемая в ходе сдвиговой деформации, определяется условиями нагружения и материалами контактирующей пары.

Ключевые слова: моделирование, контактное взаимодействие, атомный масштаб.

Известно, что контактное взаимодействие кристаллических материалов приводит к микроструктурным изменениям вблизи границы, вызванным пластической деформацией, нанокристаллизацией и аморфизацией, фрикционным нагревом, механическим перемешиванием и др. Ситуация осложняется тем, что эти явления связаны между собой и могут влиять друг на друга. Это обуславливает значительный интерес развития, в том числе вычислительных методов для изучения и анализа процессов, протекающих в поверхностных слоях твердого тела [1, 2]. Цель настоящей работы – изучение особенностей развития процессов деформации и разрушения тонких поверхностных слоев, реализуемых в условиях фрикционного контакта на наноскопическом масштабе.

Для расчетов в рамках метода молекулярной динамики был использован программный пакет LAMMPS [3]. Первоначально рассматривался фрикционный контакт монокристаллов Cu и Al, атомные решетки которых были ориентированы так, что оси X, Y и Z соответствовали кристаллографическим направлениям [100], [010] и [001] для кристаллита алюминия (рис. 1а). В одних расчетах кристаллит меди был ориентирован так, что оси X, Y и Z совпадали с направлениями [130], [-310] и [001], в других он был сонаправлен с атомной решеткой кристаллита алюминия. Моделировалось относительное проскальзывание со скоростью 20 м/с вдоль оси X. Взаимодействие между атомами описывалось в рамках метода погруженного атома. Выбор потенциала обусловлен возможностью с достаточно высокой степенью точности описывать упругие и поверхностные свойства, а также энергетические параметры дефектов данной системы. Уравнения движения интегрировались с шагом

The paper is devoted to modeling the interaction between two pure metals under shear loading. The structure of the boundary layer obtained during the shear deformation is determined by conditions of loading and the contacting pair.

Key words: modeling, contact interaction, atomic scale.

по времени $\Delta t = 0,001$ пс. Полное число атомов превышало 200000. В направлении осей X и Y моделировались периодические граничные условия, а в направлении Z нагрузка не задавалась. В расчетах менялись условия нагружения и угол относительной разориентировки атомных плоскостей в области контакта. Кроме того, путем варьирования профиля контактирующих поверхностей менялись условия сопряжения, реализуемые на контакте.

Согласно результатам исследования особенности поведения кристаллических материалов сильно зависят от условий, реализуемых на контакте. В частности, в области контакта могут наблюдаться эффекты, связанные с нарушением кристаллического порядка взаимодействующих материалов. Это сопровождается формированием слоя, в котором протекает взаимная диффузия атомов, принадлежащих обоим кристаллитам (рис. 1б). Учет атомной структуры взаимодействующих материалов позволяет выявить некоторые особенности поведения кристаллических материалов при их взаимодействии. В частности, в процессе такого взаимодействия возможно формирование разориентированной наноблочной структуры в области интерфейса, что хорошо видно на рисунке 1в. Следует отметить, что формирование блоковой структуры отмечается экспериментально вблизи поверхности в условиях трибологического контакта.

Очевидно, что интенсивные сдвиговые деформации, реализуемые в условиях контактного взаимодействия, могут приводить к существенному разогреву материала вблизи поверхности. Поэтому было исследовано влияние термофрикционного воздействия на изменение физико-механических свойств и структуры поверхностных слоев контактирующих кристаллитов. Моделировалось взаимо-

действие модельных материалов со свойствами Cu и Ag, атомные решетки которых были ориентированы так, что оси X Y и Z соответствовали кристаллографическим направлениям [100], [010] и [001] для кристаллита меди и направлениям [120], [-210] и [001] – для кристаллита серебра (рис. 2а). При этом рассматривались два варианта нагружения. В первом случае вся энергия, переданная системе за счет внешней сдвиговой деформации, перераспределялась внутри моделируемой пары. Во втором случае

со стороны нагружаемых областей моделировался специальный слой атомов, в пределах которого дополнительно задавалась диссипация кинетической энергии, тем самым имитировался отвод тепла из области контакта во внутренние слои протяженных контактирующих материалов. Таким образом, первый вариант соответствует взаимодействию двух тонких пленок, а второй вариант можно рассматривать как локальный контакт двух объемных кристаллических материалов.

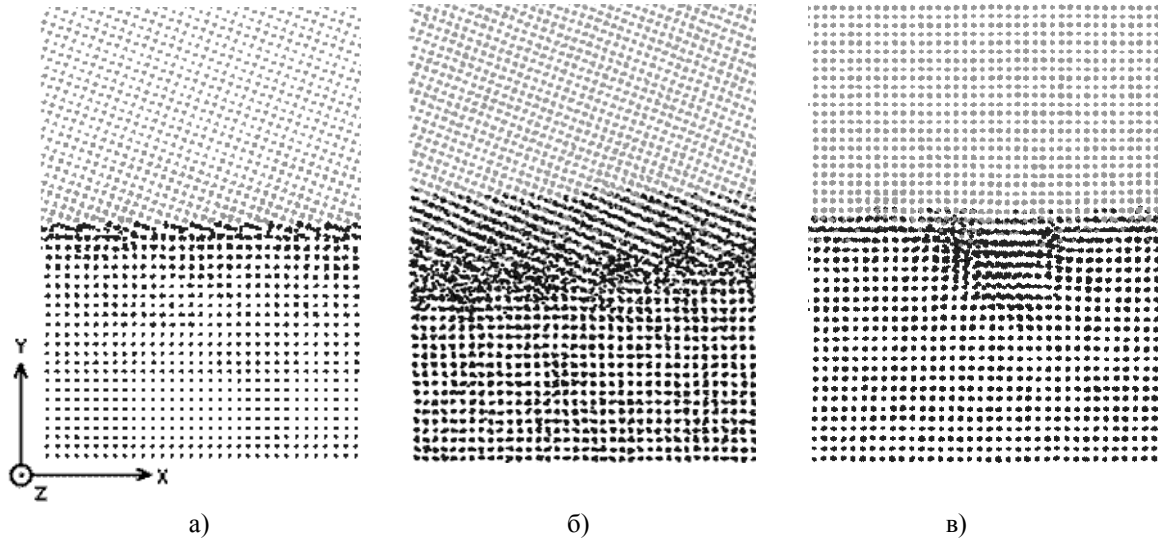


Рис. 1. а – исходная структура взаимодействующих кристаллитов; б и в – структура моделируемых кристаллитов после 500 пс, отличающихся исходной взаимной ориентацией кристаллических решеток

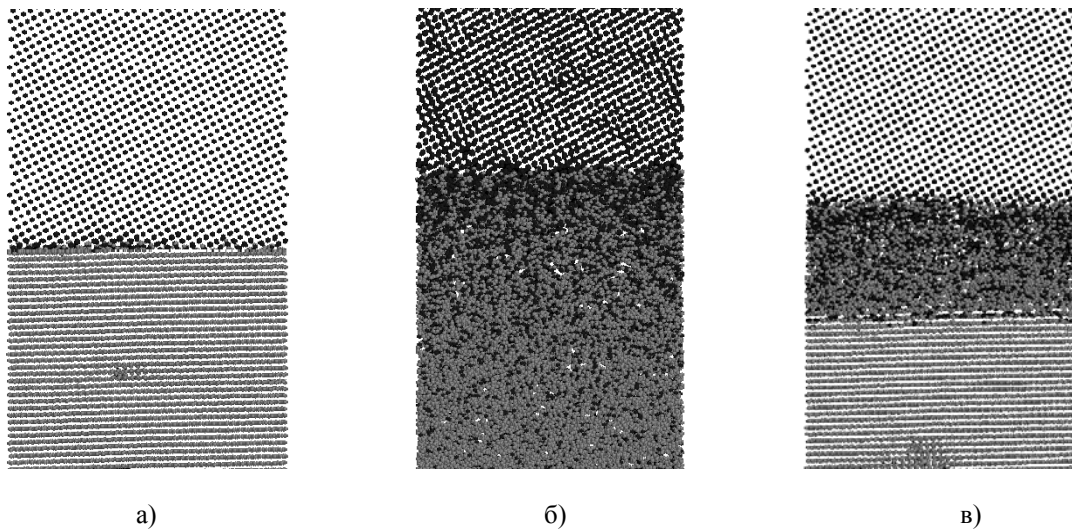


Рис. 2. Структура моделируемых кристаллитов: а – исходная; б – конечная для варианта без отвода тепла; в – конечная для варианта с отводом тепла

Согласно полученным результатам поведение материалов в области контакта для рассматриваемых вариантов заметно отличается. В случае взаимодействия двух кристаллических тонких пленок произошел разогрев области контакта с достижением температуры плавления медного кристаллита (рис. 2б).

При этом более тугоплавкий материал сохранил кристаллическую структуру. Характерно, что относительное проскальзывание взаимодействующих материалов сопровождается перемещиванием атомов в зоне контакта с ярко выраженным градиентным характером внедрения атомов Ag в кристаллит меди

практически на всю глубину моделируемого фрагмента. В случае моделирования контакта с отводом тепла происходит сохранение кристаллических решеток обоих взаимодействующих материалов при тех же прочих условиях нагружения, что и в первом варианте. При этом зона перемешивания атомов обоих веществ локализуется вблизи области контакта, а распределение атомов в области интерфейса носит равномерный характер (рис. 2в).

Несмотря на отмеченное разнообразие результатов компьютерного моделирования, полученных в рамках молекулярно-динамического исследования, во всех рассмотренных случаях можно отметить, что происходит формирование интерфейсного

слоя, имеющего отличный состав и строение от структуры в объеме материала. Особенности данного слоя отмечались и ранее, но на другом масштабном уровне. Формирование интерфейсного слоя на атомном уровне меняет свойства поверхности взаимодействующих материалов, понижает энергетические барьеры формирования новых (в том числе метастабильных) фаз и инициирования химических реакций. Результаты настоящих исследований могут быть использованы для понимания процессов, определяющих прочностные свойства интерфейсного слоя в материалах с покрытиями, а также для контроля свойств поверхностного слоя в контактных задачах.

Библиографический список

1. Iordanoff I., Berthier Y. First steps for a rheological model for the solid third body. // Tribology Series. – 1999. – V. 36.
2. Dmitriev A.I., Österle W., Kloß H. Numerical simulation of mechanically mixed layer formation at local contacts of an automotive brake system // Tribology Transactions. – 2008. – V. 51.
3. Plimpton S.J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. – 1995. – V. 117.